УДК 539.3

Ю.В. ЧОВНЮК, канд. техн. наук, «ЭКОМЕН», г. Киев

УЕДИНЁННЫЕ КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ ВОЛНЫ (СОЛИТОНЫ) ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА ИХ КЛАСТЕРНЫЕ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ

Розглянуті концентраційні хвилі (солітони) точкових дефектів у квазікристалічних структурах дисперсних систем (порошкові матеріали, які ущільнюються методом вібро-(ударного) пресування) при імпульсному лазерному впливові на їх кластерні структуроутворення.

The concentrative waves (solitones) of the dot defects in the quasicrystal structures of dispersive systems (such as powder materials packed with the help of vibro-(impact) pressing) generated by the impulse laser acting on their cluster’s structures are discussed.

Постановка проблемы. Известно, что действие мощных лазерных импульсов на твердое (квазитвердое) тело, например, на изделия из порошковых материалов (ПМ), полученные методом вибро-(ударного) прессования, при обработке последних, может привести к генерации точечных дефектов (ТД) (вакансий, межузлий) с плотностью, значительно превышающей термодинамически равновесную, различных волнообразований, термооптическому возбуждению звука/гиперзвука в обрабатываемой среде. При определённых критических условиях, как показано в работах [1 – 4, 6 – 9], концентрация ТД может претерпевать сложные динамические превращения, приводящие к самоорганизации различного рода локализованных структур: кластеров ТД или сверхрешеток плотности ТД (а также статической деформации квазирешетки). При достаточно высоких плотностях в ансамбле дефектов, благодаря нелинейной концентрационной (s –образной) зависимости функции генерации ТД из узлов квазикристаллической решетки ПМ, может наблюдаться распространение волны переключения плотности дефектов, переводящее систему из состояния с некоторым минимальным значением плотности $n_{\min}$ в состояние с максимальным значением $n_{\max}$ [3, 4]. Представления о бистабильном поведении системы ТД позволили интерпретировать фазовый переход из квазикристаллического состояния в аморфное при воздействии лазерных импульсов, не вызывающих плавления квазирешетки ПМ (твердофазная аморфизация) [3, 4].

Анализ последних исследований и публикаций. В работах [1 – 9] начато исследование различных аспектов (условий, критических параметров, характеристик и пр.) волнообразований, однако не предложено моделей распространения уединённых (солитоноподобных) концентрационных волн (УКВ) точечных дефектов в подобных квазикристаллических структурах при воздействии лазерных импульсов. Не вполне ясен и механизм возникновения УКВ, не определены профиль и скорость их распространения.

Целью настоящей работы является создание адекватной физико-механической модели возбуждения уединённых концентрационных волн (УКВ) точечных дефектов в квазикристаллических структурах уплотненных (методом вибро-(ударного) прессования) ПМ, первоначально содержащих кластеры ТД. Получены критические условия возбуждения волны плотности, оценен ее профиль и скорость распространения, учтены термооптические эффекты (генерация звука/гиперзвука), сопровождающие пространственно-временную эволюцию указанных волн. На основе предложенной в работе модели удается раскрыть физико-механический механизм возникновения УКВ, который связан с нелинейной концентрационной зависимостью функции источника дефектов. Последняя обусловлена уменьшением энергии активации дефектообразования вблизи кластеров при учете поля упругих напряжений.

Результаты исследований. Теоретический анализ возбуждения УКВ проведем в два этапа. На первом – определим все характеристики УКВ без учета термооптических эффектов. На втором этапе указанные эффекты будут учтены в уточненной модели УКВ.

1. Для реализации модели УКВ необходимо составить нелинейную систему уравнений, адекватно описывающих совместную динамику ТД и кластеров квазикристаллической структуры ПМ. Если принять, что основными процессами, контролирующими поведение во времени плотности дефектов, являются генерация, диффузия и рекомбинация (термооптические эффекты пока опущены), то в одномерном случае (для простоты) имеем:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \text{«}\sim Rn - \frac{n}{2} + D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}. \qquad (1)$$

В (1) первое слагаемое учитывает деформационно-стимулированную генерацию ТД кластерами сферической формы (R – радиус кластера; $« = 4®N_0\Omega_0^{-1}$, N_0 – плотность кластеров, Ω_0 – атомный объем; $\sim = K\Omega^2 D/kT$, К – модуль упругости, Ω – активационный объем образования ТД, D – коэффициент диффузии ТД, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура), второе слагаемое – рекомбинацию на центрах (скорость рекомбинации: $= {}_0 \exp(-W/kT) = ²^{-1}$, ${}_0 = °¬d_0^2, ²$ – время жизни ТД; ° – плотность центров рекомбинации; ¬ – дебаевская частота; d_0 – период квазирешётки ПМ; W – энергия активации диффузии дефекта), а третье – их пространственную диффузию.

Уравнение, описывающее динамику изменения во времени размеров кластеров при их «деформационном испарении», запишем в виде:

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -\frac{\sim n}{R} + D_R \cdot \frac{\partial^2 R}{\partial x^2}, \tag{2}$$

D_R – коэффициент диффузии кластера. Так как $D_R << D$, в дальнейшем (в рамках развиваемых в данной работе моделей) подвижностью кластеров будем пренебрегать.

Переходя в (1) и (2) к автомодельной переменной $¶ = x + V \cdot t$, получаем:

$$V \cdot \frac{\partial R}{\partial ¶} = -\frac{\sim n}{R}, \tag{3}$$

$$V \cdot \frac{\partial n}{\partial ¶} - D \cdot \frac{\partial^2 n}{\partial ¶^2} = «\sim Rn - \quad n. \tag{4}$$

Интегрируя (4) и вводя функцию $¦(¶) = \int_{-\infty}^{¶} nd¶$, получаем:

$$V \cdot \frac{\partial ¦}{\partial ¶} - D \cdot \frac{\partial^2 ¦}{\partial ¶^2} = «\sim \cdot \int_{-\infty}^{¶} R(¶)n(¶)d¶ - \quad ¦. \tag{5}$$

Из уравнения (3) имеем:

$$\sim \int_{-\infty}^{¶} Rnd¶ = \frac{V}{3} \cdot [R^3(-\infty) - R^3(¶)] = \frac{V}{3} \cdot [R_0^3 - R^3(¶)]. \tag{6}$$

Подставляя (6) в (5), приходим к уравнению:

$$V \cdot \frac{\partial ¦}{\partial ¶} = D \cdot \frac{\partial^2 ¦}{\partial ¶^2} + ¨(R, ¦), \qquad (7)$$

где $¨(R,¦) = «V(R_0^3 - R^3(¶)) - \ \ ¦$.

Для производной $¨_{¦}$ имеем: $¨_{¦} = 3«~R - \ \ $. Очевидно, что $¨_{¦}(0) = 3«~R_0 - \ \ > 0,$ если $~R_0 > \ \ /3«$. Учитывая, что функция $R(¦, V, R_0)$ с ростом ¦ убывает, имеем $¨_{¦}(¦) < ¨_{¦}(0)$. Отсюда следует, что имеется единственное значение $¦_* > 0$ такое, что $¨(¦_*) = 0$.

Таким образом, задачу (1) и (2) свели к задаче Колмогорова - Петровского - Пискунова [5]. Используя аналогию с этой задачей, можно утверждать, что в системе кластер и ТД может возбуждаться волна со скоростью, ограниченной снизу значением:

$$V_0 = 2\sqrt{D(3«~R_0 - \ \ )}. \qquad (8)$$

Поскольку $d¦/d¶ = n(¶)$ и при $¶ \to \mp\infty$ $d¦/d¶ \to 0$, то волна плотности ТД представляет собой уединённую (солитоноподобную) волну, распространяющуюся с минимальной скоростью (8).

Из формулы (8) следует, что $3«~R_0 > \ \ $. Таким образом, для возбуждения УКВ дефектов в квазикристаллах ПМ (после их вибро-(ударного) уплотнения) необходимо, чтобы начальный размер кластера превышал некоторый критический: $R_0 > R_*$, где $R_* = \ \ /3«~$.

Определим теперь профиль УКВ в рамках развиваемой в этом пункте работы модели. Из (3) имеем: $R^2 = R_0^2 - 2~¦/V$. Далее представляем $R(¦)$ в виде разложения $R \approx R_0 - ~¦/VR_0 + \ldots$ и подставляем в (7). Сохраняя слагаемые порядка $~^2$, получаем следующее уравнение волны:

$$V \cdot \frac{d\cdot}{d¶} = D \cdot \frac{d^2\cdot}{d¶^2} + «~(R_0 - R_*)\cdot\ \ \cdot(1 - \cdot\ \ ), \qquad (9)$$

где $\cdot\ \ = ~¦/VR_0(R_0 - R_*)$.

Точное решение этого уравнения (алгебраический, экспоненциально-степенной солитон) имеет вид:

$$\cdot\ (¶) = [1 + (\sqrt{2} - 1) \cdot \exp(-¶ / ¢)]^{-2}. \tag{10}$$

Возвращаясь к переменной $n(¶)$, для профиля УКВ окончательно имеем:

$$n(¶) = A \cdot \exp(-¶ / ¢) \cdot [1 + (\sqrt{2} - 1) \cdot \exp(-¶ / ¢)]^{-3}, \tag{11}$$

где: $A = 20® \cdot (\sqrt{2} - 1) \cdot (N_0 R_0^{\,3} / d_0^{\,3}) \cdot (1 - R_* / R_0)^2$, $¢ = \sqrt{6D / «\sim (R_0 - R_*)}$ – ширина УКВ. Очевидно, что $n(¶) \to 0$ при $¶ \to \mp\infty$.

Для скорости, соответствующей волновому решению (11), получаем:

$$V = 5 \cdot \sqrt{«\sim (R_0 - R_*) D / 2}. \tag{12}$$

Из (7) и (12) следует $V = V_0 \cdot (1 + \Delta)$, $\Delta << 1$. Это позволяет утверждать, что формула (11) удовлетворительно описывает профиль УКВ.

Анализируя (11) и (12), заметим, что условия возникновения УКВ дефектов в квазикристаллах ПМ, полученных методом вибро-(ударного) прессования, ее профиль и скорость распространения существенно зависят от начальных значений размеров самих кластеров. При более высоком начальном радиусе кластера волна плотности дефектов распространяется с большей скоростью и имеет более резкий максимум, чем волна, распространяющаяся в среде с меньшим начальным радиусом кластера.

Обобщением развитой в данном пункте работы модели (1) и (2) может служить следующая система уравнений:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial R}{\partial t} = -F(R, M) \cdot n + D_R \cdot \dfrac{\partial^2 R}{\partial x^2}, \\ \dfrac{\partial n}{\partial t} = S(R) F(R, M) n - \dfrac{n}{2} + D \cdot \dfrac{\partial^2 n}{\partial x^2}. \end{cases} \tag{13}$$

По мнению автора настоящей работы, такую систему можно решить редукционными методами возмущений, сведя (13) к (модифицированному/

обобщённому) уравнению Бюргерса. (Однако такая задача требует отдельного рассмотрения).

Здесь, в (13) $F(R,M)$ – монотонная функция R, $\{M\}$ – набор параметров, характеризующих среду (уплотнённый тем или иным способом ПМ), $S(R)$ – площадь поверхности кластера.

2. Рассмотрим возможность усиления УКВ (пилообразного типа) в ПМ, представляемом средой с внутренними источниками энергии. В связи с этим всесторонне проанализируем обобщённое уравнение Бюргерса в виде:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = ¥_1 \cdot n \cdot \frac{\partial n}{\partial x} + D \cdot \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + («\sim R_0 - \frac{1}{²}) \cdot n, \qquad (14)$$

где $¥_1 = -\frac{«\sim {}^2 V_s^{²} {}_l}{R_0 ¬}, V_s$ – скорость продольных звуковых волн в ПМ, $²_l$ – длительность импульса лазерного излучения, воздействующего на обрабатываемую среду. Появление первого члена в правой части (14) обусловлено термооптической генерацией звука в материале, но не за счёт внешней модуляции источника, а из-за модуляции коэффициента поглощения света самой звуковой волной, возникающей в ПМ, – меняя тепловыделение в среде, такая модуляция приводит к положительной обратной связи и к усилению звука [6 – 9].

При больших числах Рейнольдса, когда членом $\sim D \cdot \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$ в уравнении (14) можно пренебречь, последнее может быть решено методом характеристик [9]. Уравнения характеристик имеют вид:

$$dt = -(¥_1 n)^{-1} dx = («\sim R_0 - \frac{1}{²})^{-1} dn, \qquad (15)$$

а их общий интеграл:

$$n = \exp(¥_2 t) \cdot \Psi\{x - (¥_1/¥_2) \cdot n \cdot (1 - \exp(-¥_2 t))\}, \; ¥_2 = «\sim R_0 - \frac{1}{²}, \qquad (16)$$

где Ψ – произвольная функция, определяемая условием при $t = 0$. В случае гармонического входного сигнала, когда $n(0,x) = n_0 \sin µt$, $\Psi(¶) = n_0 \sin µ¶$.

Отсюда легко найти расстояние до образования разрыва:

$$L_H = ¥_2^{-1} \cdot \ln[1 + ¥_2 /(¥_1 n_0 \mu)]^{-1}. \qquad (17)$$

Отсюда видно, что при $¥_2 > 0$ это расстояние меньше, чем при $¥_2 = 0$ (но при $¥_2 < 0$ L_H может обратиться в бесконечность, и тогда разрыв вообще не возникает).

Нетрудно также описать эволюцию концентрационной волны на разрывной стадии. Аналогично [9] получаем уравнение для амплитуды скачка n_c:

$$(n_c / n_0) \cdot \exp(-¥_2 t) = \sin\{(¥_1 \mu / ¥_2) \cdot n_c \cdot (1 - \exp(-¥_2 t))\}. \qquad (18)$$

Отсюда, в частности, следует, что при $t \to \infty$ амплитуда скачка стремится к предельному конечному значению, равному:

$$n_\infty = ®¥_2 /(¥_1 \mu). \qquad (19)$$

Таким образом, устанавливается пилообразная автоволна концентраций ТД в ПМ, в которой подкачка энергии компенсируется диссипацией на разрыве.

Численные расчеты, проведенные на ПЭВМ, показывают, что для дефектов вакансионного типа в порошковых материалах, уплотняемых вибропрессованием:

$$kT = 0{,}04\ eV,\ \ D = 10^{-6} cm^2 \cdot s^{-1},\ \ K\Omega = 5\ eV,\ \ N_0 = 10^{14} cm^{-3},\ \ ° = 10^{10} cm^{-2},$$

для критического радиуса кластера и скорости распространения волны имеем соответственно $R_* = 3 \cdot 10^{-7} cm$ и $V = 0{,}6\ \ cm/s$.

ВЫВОДЫ

1. Таким образом, показано, что в системе ТД и кластеров ПМ, уплотняемых методом вибро-(ударного) прессования, описываемой уравнениями (1) и (2), либо уравнением (14), возможно распространение уединённых (солитоноподобных) концентрационных волн точечных дефектов (либо автоволн пилообразного типа).

2. Эти явления носят пороговый характер и имеют место, когда начальный размер кластера R_0 в облучаемом квазикристалле ПМ превышает некоторое критическое значение, определяемое плотностью центров рекомбинации, модулем упругости, дилатационным объемом ТД, характеристиками лазерного импульса (при учете термооптических эффектов в обрабатываемой среде), а также температурой материала.

3. Качественные и количественные выводы данной работы могут быть использованы для планирования экспериментов по управлению процессом накопления дефектов в порошковых материалах, уплотнённых вибро-(ударным) прессованием, при интенсивных лазерных воздействиях.

Список литературы: **1.** *Бойко В.И., Лукьянчук Б.С., Царев Е.* // Труды ИОФАН. – 1991. – Т. 30. – С. 6-82. **2.** *Мирзоев Ф.Х., Панченко В.Я., Шелепин Л.А.*//УФН. – 1996. – Т. 165. - №1. – С. 3-32. **3.** *Мирзоев Ф.Х., Шелепин Л.А.* // Письма в ЖТФ. – 1996. – Т. 22. – Вып. 13. - С. 28-31. **4.** *Мирзоев Ф.Х.* // ЖТФ. – 1998. – Т. 68. - №8. – С. 73-77. **5.** *Колмогоров А.Н., Петровский И.Г., Пискунов Н.С.* // Бюллетень МГУ. Математика и механика. – 1937. – Т. 1. - №6. – С. 1-26. **6.** *Руденко О.В.* О возможности генерации мощного гиперзвука с помощью лазерного излучения // Письма в ЖЭТФ. – 1974. – Т. 20. – Вып. 7. – С. 445-448. **7.** *Карабутов А.А., Лапшин Е.А., Руденко О.В.* О взаимодействии светового излучения со звуком в условиях проявления акустической нелинейности // ЖЭТФ. – 1976. – Т. 71. – Вып. 1. – С. 111-121. **8.** *Гусев В.Э., Руденко О.В.* Нестационарные квазиодномерные акустические течения в неограниченных объёмах с учётом гидродинамической нелинейности // Акустический журнал. – 1979. – Т. 25. – Вып. 6. – С. 875. **9.** *Наугольных К.А., Островский Л.А.* Нелинейные волновые процессы в акустике/*Под ред. А.В. Гапонова-Грехова*. - М.: Наука, 1990. – 237с.

Поступила в редколлегию 30.06.07

УДК 378.23

В.В. КАЗАКОВ, канд. техн. наук,
ЗАТ “Сєвєродонецьке об’єднання Азот”
П.В. КУЗНЄЦОВ, канд.техн.наук, НТУ “ХПИ”

ВИЗНАЧЕННЯ ПОНЯТТЯ НАУКОВА ШКОЛА ТА ЇЇ РІЗНОВИДИ В ПРАЦЯХ УЧЕНИХ

Вивчено аспекти визначення поняття наукова школа, критерії її різновиду. Досліджено джерела про визначення поняття наукова школа, вивчено критерії формування та визначення наукової